数理解析研究所講究録
18 巻 1966 年 145-162

最小自乗法におけるAlgorithm

富山大文理
京大 数研 田中 専一郎

§1. 最小自乗法とalgorithm

函数

(1.1) $$y = y(a, t) = y(a_1, a_2, \cdots, a_n, t)$$

の t_i における実験値を y_i とする。ここに t_i は

$$t_1 < t_2 < \cdots < t_m \quad (m \geqq n)$$

とし、$a = (a_1, a_2, \cdots, a_n)$ は t に無関係とする。実験値 y_i には一般には誤差を含む。このとき、

(1.2) $$S(a) = \sum_{i=1}^{m} \omega(t_i)(y(a, t_i) - y_i)^2$$

の値を最小にするという a を求めることが一般的な最小自乗法の問題である。ここで"一般的な"という意味は(1.1)の $y(a, t)$ が a に関して nonlinear でもよく、t_i が一般には不等間隔でよいからである。(1.2)における $\omega(t)$ は $\omega(t_i) > 0 \ (i = 1, 2, \cdots, m)$ となる函数で weight function と呼ばれる。

D を n 次元Euclid空間 R^n における有界な閉集合とし、例えば a について、$y(a, t_i) \in C^{\infty}(D)$ と仮定しても、D 全体における $S(a)$ の最

小値を求めることは，特別な場合を除き，極めてむづかしい．そこでわれわれの問題を local な問題，即ち $U\subset D$ の適当な近傍 U をとったとき，U における最小値（もしあれば）とその最小値をとる a を求める問題としよう．そのとき

$$f_i(a)=\sqrt{w(t_i)}\,(y(a,t_i)-y_i)\qquad(i=1,2,\cdots,m)$$

と考えることにより上の問題は次のように一般化することが出来る

$$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)\in R^n,$$

$$f(x)=(f_1(x),f_2(x),\cdots,f_m(x))\in R^m\quad(m\geqq n),$$

$$S(x)=|f(x)|^2\ \left(\equiv\sum_{i=1}^{m}(f_i(x))^2\right)$$

とおく．R^n の領域 D において

(A.1) $\qquad f(x)\in C^3(D),$

(A.2) $\qquad \mathrm{grad}\,S(x)=0$ をみたす $x=\bar{x}$ が D の中に存在する

(A.3) $\qquad$ この条件については §2. で精しく述べられる．

の仮定のもとに，$\bar{x}\in U\subset D$ なる適当な近傍 U をとり，$\min_{x\in U}S(x)$ となる x を決定する．

特に (1.1) が a に関して linear，即ち

$$y(a,t)=\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(t)$$

の型のときは，いわゆる最小自乗法として知られているが，われわれの準備としてそれに対応する $\quad f(x)=Ax+b\quad$ の場合を考えよう．

補助定理 1 $\quad A$ は rank n の $m\times n$ 行列，x および b はそれぞれ n および m 次元ベクトルとし，

$$f(x)=Ax+b$$

とする　$S(x)=|f(x)|^2$ の値を最小にする $\bar{x}$ は連立一次方程式

$$A^*Ax+A^*b=0$$

の根であり，$\bar{x}=-(A^*A)^{-1}A^*b$ とおける．ここに A^* は A の転置行列である．また，任意の $x\in R^n$ に対して

$$S(x)=S(\bar{x})+|A(x-\bar{x})|^2$$

が成り立ち，従って $x\neq\bar{x}$ の任意の x に対して

$$S(x)>S(\bar{x})$$

である．

つぎに x は固定されたベクトルとし

$$S(x)=|f(x)|^2,\quad S(x,h)=|A(x)h+f(x)|^2$$

とおき，この h を補助定理1の x と考えれば，直ちに次の補助定理2をうる．

補助定理2　x は固定されたベクトルとする．$m\times n$ 行列 $A(x)$ の rank が n ならば

$$S(x,h)=|A(x)h+f(x)|^2$$

を最小にする $\bar{h}$ は

$$A^*(x)A(x)\bar{h}=-A^*(x)f(x)$$

または $\bar{h}=-(A^*(x)A(x))^{-1}A^*(x)f(x)$ で与えられる．さらに $h\in R^n$ の任意の h に対して

$$S(x,h)-S(x,\bar{h})=|A(x)(h-\bar{h})|^2$$

が成りたち，特に $h=0$ とおけば

$$S(x)-S(x,\bar{h})=|A(x)\bar{h}|^2.$$

この準備のもとに、われわれの問題に戻ろう。$f(x)\in C^3$ より絶対値の十分小さい h に対して

$$f(x+h) \doteqdot f(x)+A(x)h$$

が成り立つ。ここに x は一応固定されたベクトル；$A(x)$ は $m\times n$ $(m\geqq n)$ の Jacobi 行列

$$(1.3)\qquad A(x)=\left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}\right)\qquad (i=1,2,\cdots,m,\ j=1,2,\cdots,n)$$

である。$\bar{x}$ のある近傍で $A(x)$ の rank は n であると仮定しよう。$S(x)=|f(x)|^2$ の最小値を求めるため適当な初期値 $x^{(0)}$ を選ぶ。$|f(x^{(0)}+h)|$ の最小値をとる h を直接求めることは一般には簡単ではない。そこで

$$|f(x^{(0)}+h)| \doteqdot |f(x^{(0)})+A(x^{(0)})h|$$

であることと、$S(x^{(0)},h)=|f(x^{(0)})+A(x^{(0)})h|^2$ の最小値をとる $h=h^{(0)}$ は補助定理2より容易に求まるから、この $h^{(0)}$ をもって $|f(x^{(0)}+h)|^2$ の最小値を与える h の近似と考える。いいかえれば、$x=x^{(0)}+h^{(0)}$ をもって $|f(x)|^2$ の最小値をとる x の第1近似と考える。この意味から $x^{(1)}=x^{(0)}+h^{(0)}$ とおく。

帰納法により次の点列 $\{x^{(s)}\}$, $\{h^{(s)}\}$ が得られる。即ち適当に $x^{(0)}$ を初期値にとれば、$s=0,1,2,\cdots$ なるすべての s に対して $x^{(s)}$ に対して

$$S(x^{(s)},h)=|A(x^{(s)})h+f(x^{(s)})|^2$$

を最小にする $h=h^{(s)}$ を選ぶ。つぎに $x^{(s+1)}=x^{(s)}+h^{(s)}$ とおく。この点列の求め方を algorithm の型に書けば次のようになる。

<u>Algorithm</u> (Jacobi)　<u>適当に初期値</u> $x^{(0)}$ <u>を選ぶ</u>　$s=0,1,2,\cdots$ に<u>ついて</u> $x^{(s)}$ <u>に対する連立一次方程式</u>

(1.4) $$A^*(x^{(s)})A(x^{(s)})h^{(s)} = -A^*(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

により $h^{(s)}$ をきめる $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく

この algorithm はまた

$$x^{(s+1)} = x^{(s)} - (A^*(x^{(s)})A(x^{(s)}))^{-1}A^*(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

とまとめて書くことも出来る

この algorithm を最小自乗法における Jacobi の algorithm という

§2. Jacobi の algorithm

$n \times n$ 行列 $C(x)$ を

(2.1) $$C(x) = \left(\sum_{i=1}^{m} f_i(x)\frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_j \partial x_k}\right) \qquad (j, k = 1, 2, \cdots, n)$$

によって定義する Jacobi の algorithm で $A(x^{(s)})$ の rank が n であることが必要であった $s \to \infty$ のとき $x^{(s)} \to \bar{x}$ となるであろうから この algorithm を用いる限り

$$\operatorname{rank}(A(\bar{x})) = n$$

を仮定することは当然なことである このとき $\min_{|h|=1} |A(\bar{x})h|^2 > 0$ が成立つ. われわれは定理の中でより強い条件

(A.3) $$\min_{|h|=1} |A(\bar{x})h|^2 > \|C(\bar{x})\|$$

を仮定するであろう. ここに $\|C(x)\|$ は行列 $C(x)$ のノルムを表わす

$C_i(x)$ を

$$C_i(x) = \left(\frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_j \partial x_k}\right) \qquad (j, k = 1, 2, \cdots, n)$$

とおけば, $\|C(\bar{x})\| \leq |f(\bar{x})|\sqrt{\sum_{i=1}^{m}\|C_i(\bar{x})\|^2}$. 一方 実際の問題では

$$f_i(x) = \sqrt{w(t_i)}\,(y(x_1, x_2, \cdots, x_n, t_i) - y_i)$$

であり，y_i のとり方から optimum solution $x=\bar{x}$ における $|f(x)|$ は一般には小さい．そこで $|f(\bar{x})|$ が少くとも不等式

$$\min_{|h|=1} |A(\bar{x})h|^2 > |f(\bar{x})| \sqrt{\sum_{i=1}^{r} \|C_i(\bar{x})\|^2}$$

を満たすならば (A.3) が成り立つ，このような意味で (A.3) を仮定する．

仮定 (A.3) に関する補助定理を述べよう．

$$H=\{h \mid |h|=1,\ h\in R^n\},\quad M(x)=\min_{H} |A(x)h|^2$$

とおく．

補助定理3．$m\times n$ 行列 $A(x)$ の要素は領域 D で連続とする．任意の正数 ε に対して $\bar{x}$ の適当な δ 閉近傍 V_δ を D の中にとれば

$$0 \le \min_{H} |A(\bar{x})h|^2 - \min_{V_\delta\times H} |A(x)h|^2 < \varepsilon .$$

補助定理4．$A(x)$, $C(x)$ の要素は D で連続，かつ仮定 (A.3) を満たす．そのとき，不等式

$$r = \|C(\bar{x})\| \big/ M(\bar{x}) + \varepsilon_0 < 1$$

を満たす任意のしかも固定した正数 ε_0 を選ぶ，それに対して

$$0 < \mu < \varepsilon = \frac{\varepsilon_0 M(\bar{x})^2}{(1+\varepsilon_0)M(\bar{x}) + \|C(\bar{x})\|}$$

を満たす μ を選ぶ．そのとき $\bar{x}$ の適当な δ 閉近傍 V_δ を D の中にとれば

$$\frac{\max_{V_\delta} \|C(x)\| + \mu}{\min_{V_\delta\times H} |A(x)h|^2} < \frac{\|C(\bar{x})\|}{M(\bar{x})} + \varepsilon_0$$

補助定理4の系．$A(x)$, $C(x)$ の要素は D で連続かつ仮定 (A.3) を満たす．そのとき次の命題 (A.3) と (A.4) は同値である．

(A.3) $$\|C(\bar{x})\| < \min_{H} |A(\bar{x})h|^2,$$

(A.4) $$\max_{V} \| C(x) \| + \mu < \min_{V, H} | A(x) h |^2$$
を満たす正数 μ と $\bar{x}$ の閉近傍 V が存在する

これらの補助定理の証明は数研講究録数値解析セミナーII に述べられる

ここで 最小自乗法における Jacobi の algorithm に関する定理を述べよう

定理1. (A.1) R^n の領域 D で $f(x) \in C^2(D)$,

(A.2) $\operatorname{grad} S(x) = 0$ を満たす $x = \bar{x}$ が D の中に存在する,

(A.3) $\| C(\bar{x}) \| < \min_{H} | A(\bar{x}) h |^2$

以上 (A.1), (A.2), および (A.3) の仮定のもとに, 適当な正数 δ_0 を選べば $| x^{(0)} - \bar{x} | \leq \delta_0$ を満たす出発値 $x^{(0)}$ と Jacobi の algorithm (1.4) によってきまる系列 $\{x^{(s)}\}$ および $\{h^{(s)}\}$ に対して (I), (II), (III), (IV) が成り立つ

(I) $x = \bar{x}$ は V_{δ_0} における $S(x)$ の最小値を与える

(II) $$| x^{(s+1)} - \bar{x} | \leq r | x^{(s)} - \bar{x} |, \quad (s = 0, 1, 2, \cdots)$$

(III) $$| h^{(s+1)} | \leq r | h^{(s)} |, \quad (s = 0, 1, 2, \cdots)$$

(IV) $$S(x^{(s+1)}) \leq S(x^{(s)}), \quad (s = 0, 1, 2, \cdots)$$

ここに r は補助定理3の r 即ち
$$r = \frac{\| C(\bar{x}) \|}{\min | A(\bar{x}) h |^2} + \varepsilon_0 < 1.$$

この定理の証明も前述数値解析セミナーII に述べられ, また定理2(後述)に殆んど含まれるので省略する

§3. Newton-Jacobi の algorithm

方程式 $g(x) = 0$ の根を数値的に求める方法のうち, Newton法は極めて有力である. いま

(1) $g(x)=0$ をみたす $x=\bar{x}$ が存在する

(2) $\bar{x}$ の近傍で $g(x)$ の Jacobi 行列 $J(x)$ は正則である。

この二条件のもとで Newton の procedure は次のように書くことが出来る

(α) 初期値 $x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の近傍の中に適当に選ぶ。

(β) 任意の non-negative integer s に対して

(3.1) $$J(x^{(s)})h^{(s)}=-g(x^{(s)})$$

を満たす $h^{(s)}$ に対して $x^{(s+1)}=x^{(s)}+h^{(s)}$ とおく

さて最小自乗法において $S(x)=\sum_{i=1}^{m}(f_i(x))^2$ の値を最小にする x は $\mathrm{grad}\, S(x)=0$ を満たす。$\mathrm{grad}\, S(x)=0$ すなわち

$$g_j(x)=\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}f_i(x)=0 \quad (j=1,2,\cdots,n)$$

の根を Newton 法で求めるとき、最小自乗法における Newton 法という。

そのとき $g(x)$ の Jacobi 行列 $J(x)$ の j,k 要素は

$$\frac{\partial g_j(x)}{\partial x_k}=\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}\cdot\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_k}+f_i(x)\cdot\frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_j\,\partial x_k}\right)$$

であるから (3.1) に対応する h に関する一次方程式は

(3.2) $$(A^*(x^{(s)})A(x^{(s)})+C(x^{(s)}))h^{(s)}=-A^*(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

と書かれる。ここに $A(x)$, $C(x)$ はそれぞれ (1.3) (2.1) によって定義された行列である。

よって最小自乗法における Newton の procedure は次のようになる。

(α) 初期値 $x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の近傍の中に適当に選ぶ。

(β) 任意の non-negative integer s に対して $x^{(s)}$ が既知ならば (3.2) を満たす $h^{(s)}$ に対して $x^{(s+1)}=x^{(s)}+h^{(s)}$ とおく。

ここでNewtonのprocedureを一般化したprocedureを考える. そのため. Jacobiのprocedureとnewtonのprocedureとを比較する これらのprocedureで異なるのは h を求める連立一次方程式

(1.4) $$A^*(x^{(s)})A(x^{(s)})h^{(s)}=-A^*(x^{(s)})f(x^{(s)}) \qquad (\text{Jacobi})$$

(3.2) $$(A^*(x^{(s)})A(x^{(s)})+C(x^{(s)}))h^{(s)}=-A^*(x^{(s)})f(x^{(s)}) \qquad (\text{Newton})$$

であり, $C(x)$ があるかないかの違いのみである. よって h を求める方程式を, λ を $0\leq\lambda\leq 1$ の定数として

(3.3) $$B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}=-A^*(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

ここに $$B_\lambda(x^{(s)})=A^*(x^{(s)})A(x^{(s)})+(1-\lambda)C(x^{(s)})$$

とするprocedureを考えれば. JacobiとNewtonのprocedureを同時に扱うことが出来る. よって新しいprocedureを次のように定義しよう.

(α) $x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の近傍の中に適当に選ぶ.

(β) 任意のnon-negative integer s に対して

$$B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}=-A^*(x^{(s)})f(x^{(s)}) \qquad (0\leq\lambda\leq 1)$$

を満たす $h^{(s)}$ を求める $x^{(s+1)}=x^{(s)}+h^{(s)}$ とおく

このalgorithmを最小自乗法におけるNewton-Jacobiのalgorithmといい, これによって $S(x)$ の最小値を求める方法をNewton-Jacobiの方法という.

補助定理5. $\min\limits_H|A(\bar{x})h|^2>\|C(\bar{x})\|$ ならば $0\leq\lambda\leq 1$ の任意の λ に対して $\min\limits_H(B_\lambda(\bar{x})h,h)>\lambda\|C(\bar{x})\|$.

証明. C を任意の $n\times n$ 行列とする. $h\in H$ の任意の h に対して

$$\|C\|\geq|(Ch,h)|$$

よって I を単位行列とするとき 任意の $h\in H$ に対して

$$((\|C\|I+C)h,h)\geqq 0$$

さて $$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h,h)=(B_\lambda(\bar{x})\hat{h},\hat{h})$$
を満たす $\hat{h}\in H$ が存在する. よって

$$\begin{aligned}\min_H (B_\lambda(\bar{x})h,h) &= (B_\lambda(\bar{x})\hat{h},\hat{h})\\ &=((A^*(\bar{x})A(\bar{x})-(1-\lambda)\|C(\bar{x})\|\hat{h},\hat{h})\\ &\quad+(1-\lambda)((\|C(\bar{x})\|I+C(\bar{x}))\hat{h},\hat{h})\\ &\geqq ((A^*(\bar{x})A(\bar{x})-(1-\lambda)\|C(\bar{x})\|I)\hat{h},\hat{h})\\ &\geqq \min_H (A^*(\bar{x})A(\bar{x})h,h)-\|C(\bar{x})\|+\lambda\|C(\bar{x})\|\\ &>\lambda\|C(\bar{x})\|.\end{aligned}$$
(証明終)

補助定理6. 任意の正数 ε に対して, 適当な $\bar{x}$ の閉近傍 $\bar{V}_\lambda$ を選べば

$$0\leqq \min_H (B_\lambda(\bar{x})h,h)-\min_{\bar{V}_\lambda\times H}(B_\lambda(x)h,h)\leqq\varepsilon,$$
$$0\leqq \max_H \|C(x)\|-\|C(\bar{x})\|\leqq\varepsilon.$$

証明. 仮定より任意の正数 ε に対して, 適当な $\bar{x}$ の閉近傍 $\bar{V}_\lambda$ を選べば, $x\in\bar{V}_\lambda$ の任意の x に対して

$$\|B_\lambda(x)-B_\lambda(\bar{x})\|\leqq\varepsilon,\quad \|C(x)-C(\bar{x})\|\leqq\varepsilon$$

が成り立つ. 従って

$$0\leqq\max_{\bar{V}_\lambda}\|C(x)\|-\|C(\bar{x})\|\leqq\varepsilon,$$

一方 $$(B_\lambda(\bar{x})\bar{h},\bar{h})=\min_H(B_\lambda(\bar{x})h,h),$$
$$(B_\lambda(\hat{x})\hat{h},\hat{h})=\min_{\bar{V}_\lambda\times H}(B_\lambda(x)h,h)$$

とおけば, $\hat{x}\in\bar{V}_\lambda$, $\bar{h},\hat{h}\in H$ であるから,

$$\begin{aligned}0&\leqq(B_\lambda(\bar{x})\bar{h},\bar{h})-(B_\lambda(\hat{x})\hat{h},\hat{h})\\ &\leqq(B_\lambda(\bar{x})\hat{h},\hat{h})-(B_\lambda(\hat{x})\hat{h},\hat{h})\end{aligned}$$

$$= ((B_\lambda(\bar{x}) - B_\lambda(\hat{x}))\hat{h}, \hat{h})$$
$$\leqq \| B_\lambda(\bar{x}) - B_\lambda(\hat{x}) \| \leqq \varepsilon.$$ （証明終）

補助定理6の系．$\bar{x}$ の δ_λ 開近傍 V_λ と正数 μ_λ を適当に選べば，

$$\min_{V_\lambda \times H} (B_\lambda(x)h, h) > \lambda \max_{V_\lambda} \| C(x) \| + \mu_\lambda$$

証明．補助定理5より

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) > \lambda \max \| C(x) \| + \mu_\lambda$$

を満たす正数 μ_λ が存在する．(註1) この両辺の差を 3ε とおき補助定理6を用いる．

補助定理7．任意の正数 ε に対して $\bar{x}$ の $\delta_{\lambda 1}$ 近傍 $V_{\lambda 1}$ をとれば，(註2) $x^{(0)} \in V_{\lambda 1}$ を満たす任意の $x^{(0)}$ に対して $|h^{(0)}| \leqq \varepsilon$.

証明．$A^*(\bar{x})f(\bar{x}) = 0$ かつ $|A^*(x)f(x)|$ は x について連続であるから $|x^{(0)} - \bar{x}| \leqq \delta_{\lambda 1}$ の任意の $x^{(0)}$ に対して

$$|A^*(x^{(0)})f(x^{(0)})| / \mu_\lambda \leqq \varepsilon$$

が成り立つ．ところが $h^{(0)} \neq 0$ として $x^{(0)} \in V_{\lambda 1}$ の任意の $x^{(0)}$ に対して

$$\mu_\lambda |h^{(0)}|^2 \leqq (B_\lambda(x^{(0)})h^{(0)}, h^{(0)}) = -(A^*(x^{(0)})f(x^{(0)}), h^{(0)})$$
$$\leqq |A(x^{(0)})f(x^{(0)})| \, |h^{(0)}|$$

従って $|h^{(0)}| \leqq |A^*(x^{(0)})f(x^{(0)})| / \mu_\lambda \leqq \varepsilon.$ （証明終）

（註1）　補助定理5の証明をみれば

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) - \lambda \| C(\bar{x}) \| \geqq \min_H |A(\bar{x})h|^2 \| C(\bar{x}) \|$$

であるから，μ_λ は λ に無関係に選ぶことが出来る

（註2）　補助定理7の証明をみれば，註1の注意により μ_λ は λ に無関係に選べるから $V_{\lambda 1}$ は λ に無関係に選ぶことが出来る

定理2を述べる前に 定理で用いられる記号について述べる

$$M_\lambda(x^{(s)}) = \min_H (B_\lambda(x^{(s)})h,\ h),$$

$$M_\lambda = \min_{D_\lambda \times H} (B_\lambda(x)h,\ h),$$

$$K = \frac{\max_{D_\lambda} \|C(x)\| + M_\lambda}{M_\lambda} < 1$$

定理2. 定理1と同じ仮定のもとに 適当な正数 $\delta_{\lambda 0}$ を選べば $|x^{(0)}-\bar{x}| \le \delta_{\lambda 0}$ を満たす任意の出発値と Newton-Jacobi の algorithm によってきまる $\{x^{(s)}\}$ および $\{h^{(s)}\}$ に対して (I), (II), (III), (IV) が成り立つ.

(I) $\bar{x}$ の適当な近傍をとると $x=\bar{x}$ はその近傍で $S(x)$ の最小値を与える.

(II) $$|x^{(s+1)}-\bar{x}| \le r_{\lambda 1}^{(s)} |x^{(s)}-\bar{x}| \quad (s=0,1,2,\cdots)$$

ここに $r_{\lambda 1}^{(s)}$ は

$$r_{\lambda 1}^{(s)} = \frac{\lambda \|C(\bar{x})\| + L_\lambda |x^{(s)}-\bar{x}|}{M_\lambda(x^{(s)})} \le K \ (<1),$$

(III) $$|h^{(s+1)}| \le r_\lambda^{(s)} |h^{(s)}| \quad (s=0,1,2,\cdots)$$

ここに $r_\lambda^{(s)}$ は

$$r_\lambda^{(s)} = \frac{\lambda \|C(x^{(s)})\| + L_\lambda |h^{(s)}|}{M_\lambda} \le K.$$

(IV) $$S(x^{(s+1)}) \le S(x^{(s)}) \quad (s=0,1,2,\cdots)$$

(I)の証明. $\mathrm{grad}\, S(\bar{x})=0$ であるから 補助定理5 の直接の結果である. 即ち 補助定理5 で $\lambda=0$ とおけばよい.

(II)の証明. $p^{(s)}=x^{(s)}-\bar{x}$ $(s=0,1,2,\cdots)$ とおく. $h^{(s)}=x^{(s+1)}-x^{(s)}$ $=p^{(s+1)}-p^{(s)}$ であるから (3.3) の中に代入すると,

(3.4) $$B_\lambda(x^{(s)})p^{(s+1)} = B_\lambda(x^{(s)})p^{(s)} - A^*(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

をうる. $x^{(s)}=\bar{x}+p^{(s)}$ に注意して

(3.5) $$g_\lambda(p^{(s)}) = (B_\lambda(x^{(s)}) + \lambda C(\bar{x}))p^{(s)} - A^t(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

とおけば $g_\lambda(p^{(s)})$ はベクトルで ある適当な正数 δ_λ をとれば $|x^{(s)}-\bar{x}|\le\delta_\lambda$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|g(p^{(s)})| \le L_\lambda |p^{(s)}|^2$$

が成立つことを示す そのため (3.5) を成分について書けば

$$g_{\lambda j}(p^{(s)})$$
$$= \sum_{i,k}\Big(\frac{\partial f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_j}\cdot\frac{\partial f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_k} + (1-\lambda)f_i(\bar{x}+p^{(s)})\frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_j\partial x_k}$$
$$+\lambda f_i(\bar{x})\frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j\partial x_k}\Big)p_k^{(s)} - \sum_i\frac{\partial f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_j}\cdot f_i(\bar{x}+p^{(s)})$$
$$= \sum_{i,k}\Big(\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_j}\cdot\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_k} + f_i(\bar{x})\frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j\partial x_k} + O(p)\Big)p_k^{(s)}$$
$$-\sum_i\Big(\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_j} + \sum_k\frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j\partial x_k}p_k^{(s)} + \cdots\Big)\Big(f_i(\bar{x}) + \sum_k\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_k}p_k^{(s)} + \cdots\Big)$$

この式で p について一次の項まで計算すれば $\frac{1}{2}\operatorname{grad} S(\bar{x}) = \sum_i\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_j}f_i(\bar{x}) = 0$ を用いて 0 となる. 従って適当な正数 L_λ と δ_λ をとれば $|x^{(s)}-\bar{x}| = |p^{(s)}| \le \delta_\lambda$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|g_\lambda(p^{(s)})| \le L_\lambda |p^{(s)}|^2.$$

(3.4) と (3.5) を用いて

$$B_\lambda(x^{(s)})p^{(s+1)} = -\lambda C(\bar{x})p^{(s)} + g_\lambda(p^{(s)})$$

この両辺と $p^{(s+1)}$ との内積をとると

$$(B_\lambda(x^{(s)})p^{(s+1)}, p^{(s+1)}) = -\lambda(C(\bar{x})p^{(s)}, p^{(s+1)}) + (g_\lambda(p^{(s)}), p^{(s+1)})$$

ところが $M_\lambda(x) = \min_H (B_\lambda(x)h, h)$ であるから

$$M_\lambda(x^{(s)})|p^{(s+1)}|^2 \le (B_\lambda(x^{(s)})p^{(s+1)}, p^{(s+1)})$$
$$\le \lambda\|C(\bar{x})\||p^{(s)}||p^{(s+1)}| + L_\lambda|p^{(s)}|^2|p^{(s+1)}|$$

従って $|x^{(s)}-\bar{x}| \leq \delta_\lambda$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|p^{(s+1)}| \leq \frac{\lambda\|C(\bar{x})\| + L_\lambda|p^{(s)}|}{M_\lambda(x^{(s)})}\cdot|p^{(s)}|$$

をうる．正数 $\delta_{0\lambda}$ として

$$\delta_{0\lambda} = min\,(\mu\lambda/M_\lambda,\ \delta_\lambda)$$

をとれば $|x^{(s)}-\bar{x}| \leq \delta_{0\lambda}$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$\frac{\lambda\|C(\bar{x})\|+L_\lambda|p^{(s)}|}{M_\lambda(x^{(s)})} \leq \frac{\lambda\|C(\bar{x})\|+\mu_\lambda}{M_\lambda} = K\ (<1)$$

よって初期値を $|x^{(0)}-\bar{x}| \leq \delta_{\lambda 0}$ の範囲にとれば

$$|p^{(1)}| \leq r_{\lambda 1}^{(0)}\,|p^{(0)}|$$

が成り立つ．ここに

$$r_{\lambda 1}^{(s)} = \frac{\lambda\|C(\bar{x})\|+L_\lambda|p^{(s)}|}{M_\lambda(x^{(s)})}$$

よって帰納法を用いれば

$$|x^{(s+1)}-\bar{x}| \leq \frac{\lambda\|C(\bar{x})\|+L_\lambda|x^{(s)}-\bar{x}|}{M_\lambda(x^{(s)})}|x^{(s)}-\bar{x}|$$

（III）の証明．$h^{(s+1)}=0$ のとき（III）は明らかに成立つから．$h^{(s+1)}\neq 0$ とする．まず $|h^{(s)}|$ と $|h^{(s+1)}|$ の間の不等式を導く．(3.2) より

(3.6) $$\{A^*(x^{(s+1)})A(x^{(s+1)})+(1-\lambda)C(x^{(s+1)})\}h^{(s+1)}=A^*(x^{(s+1)})f(x^{(s+1)})$$

が成立ち．この右辺を各成分について計算すれば $j=1,2,\cdots,n$ に対して

(3.7) $$\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial f_i(x^{(s+1)})}{\partial x_j}\cdot f_i(x^{(s+1)})$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial f_i(x^{(s)}+h^{(s)})}{\partial x_j}\cdot f_i(x^{(s)}+h^{(s)})$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j}+\sum_{p=1}^{n}\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j\partial x_p}h_p^{(s)}+\cdots\right)\left(f_i(x^{(s)})+\sum_{p=1}^{n}\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_p}h_p^{(s)}+\cdots\right)$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j}f_i(x^{(s)})+\sum_{p=1}^{n}\left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j}\cdot\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_p}+f_i(x^{(s)})\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j\partial x_p}\right)h_p^{(s)}\right.$$
$$\left.+\cdots\right)$$

一方 $h^{(s)}$ のきめ方から

$$\sum_{i,p}\left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j}\,\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_p}+(1-\lambda)f_i(x^{(s)})\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j\partial x_p}\right)h_p^{(s)}=-\sum_i\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j}f_i(x^{(s)})$$

から (3.7) は

$$\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial f_i(x^{(s+1)})}{\partial x_j}f_i(x^{(s+1)})=\lambda\sum_{p=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{m}f_i(x^{(s)})\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j\partial x_p}\right)h_p^{(s)}-g_j(x^{(s)},h^{(s)})$$

とかかれる. ここに $g_j(x,h)$ は十分小さい h に対して

$$|g_j(x,h)|\le K_j|h|^2 \qquad (j=1,2,\cdots,n)$$

が成立ち, 従って (3.7) は

(3.8) $$B_\lambda(x^{(s+1)})h^{(s+1)}=-\lambda C(x^{(s)})h^{(s)}+g(x^{(s)},h^{(s)})$$

と書かれる. ここに $g(x,h)$ は $g_j(x,h)$ を成分にもつベクトルで

(3.9) $$|x-\bar{x}|<\delta,\qquad |h|<\alpha$$

の (x,h) に対して不等式

$$|g(x,h)|\le L_\lambda|h|^2$$

を満たす正数 L_λ が存在する. 仮定より $h^{(s+1)}\neq 0$ であるから $h^{(s+1)}$ と (3.8) の内積を考えれば (II) の場合と殆んど同様にして

(3.10) $$|h^{(s+1)}|\le\frac{\lambda\|C(x^{(s)})\|+L_\lambda|h^{(s)}|}{M_\lambda(x^{(s+1)})}\cdot|h^{(s)}|$$

が成立つ. $M_\lambda=\min_{U_\lambda\times H}(B_\lambda(x)h,h)$ とおけば $M_\lambda\le M_\lambda(x^{(s+1)})$ であるから

(3.11) $$|h^{(s+1)}|\le\frac{\lambda\|C(x^{(s)})\|+L_\lambda|h^{(s)}|}{M_\lambda}\cdot|h^{(s)}|$$

をうる. (3.10) および (3.11) は $|h^{(s)}|$ と $|h^{(s+1)}|$ との間の不等式関係である.

次に $\{h^{(s)}\}$ が $|h^{(s)}|$ の意味で単調に減少して 0 に近づくことを示すため帰納法を用いる. 補助定理7より適当に $\delta_{\lambda 1}$ 近傍 $(\delta_{\lambda 1}\le\delta_{\lambda 0})$ を選べば $|x^{(0)}-\bar{x}|\le\delta_{\lambda 1}$ の任意の $x^{(0)}$ に対して

$$|h^{(0)}| \le \min(\mu_\lambda/L_\lambda, \alpha)$$

従って

$$L|h^{(0)}| \le \mu_\lambda, \quad |h^{(0)}| \le \alpha$$

が成立つ．よって $h^{(0)}$ は (3.9) の範囲にある．従って

$$K = \frac{\lambda \max_{V_\lambda} \|C(x)\| + \mu_\lambda}{\min_{V_\lambda \times H} (B_\lambda(x)h, h)} < 1$$

とおくとき

$$r_\lambda^{(0)} = \frac{\lambda \|C(x^{(0)})\| + L_\lambda |h^{(0)}|}{M_\lambda} \le K$$

$$|h^{(1)}| \le r_\lambda^{(0)} |h^{(0)}|$$

帰納法によって

$$|h^{(s+1)}| \le r_\lambda^{(s)} |h^{(s)}|$$

$$r_\lambda^{(s)} = \frac{\lambda \|C(x^{(s)})\| + L_\lambda |h^{(s)}|}{M_\lambda} \le K < 1.$$

(IV) の証明

$$
\begin{aligned}
&S(x^{(s+1)}) - S(x^{(s)}) \\
&= \sum_{i=1}^{m} (f_i(x^{(s)} + h^{(s)}))^2 - \sum_{i=1}^{m} (f_i(x^{(s)}))^2 \\
&= \sum_{i=1}^{m} \left\{ \left(f_i(x^{(s)}) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} h_j^{(s)} + \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^{n} \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_j^{(s)} h_k^{(s)} + \cdots \right)^2 - (f_i(x^{(s)}))^2 \right\} \\
&= 2 \sum_{i,j} f_i(x^{(s)}) \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} h_j^{(s)} + ((A^*(x^{(s)})A(x^{(s)}) + C(x^{(s)}))h^{(s)}, h^{(s)}) + \cdots \\
&= -2\,(B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + (B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + \lambda(C(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + \cdots \\
&= -(B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + \lambda(C(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) + \cdots
\end{aligned}
$$

右辺の $\cdots$ は $h^{(s)}$ に関し三次以上の項をあらわす．適当な正数 L_λ, δ_λ', α_λ' を選べば，

$$|x^{(s)}-\bar{x}| \leq \delta_\lambda', \quad |h^{(s)}| \leq \alpha_\lambda' \qquad (\ )$$

において

$$S(x^{(s+1)})-S(x^{(s)}) \leq -(B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)})+\lambda(C(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)})+L_\lambda|h^{(s)}|^3$$

が成立つ．さらに適当な正数 δ_λ'' を選べば（$\delta_\lambda'' \leq \delta_\lambda'$）$|x^{(0)}-\bar{x}| \leq \delta_\lambda''$ の任意の $x^{(0)}$ に対して

$$|h^{(0)}| \leq \min(\mu_\lambda/L_\lambda, \alpha_\lambda')$$

が成立つ．よって $|x^{(0)}-\bar{x}| \leq \delta_\lambda''$ をみたす $x^{(0)}$ を出発値として選ぶとき，$|\rho^{(s)}| = |x^{(s)}-\bar{x}|$，$|h^{(s)}|$ の広義単調減少性から

$$|x^{(s)}-\bar{x}| \leq \delta_\lambda'', \quad |h^{(s)}| \leq \min(\mu_\lambda/L_\lambda, \alpha_\lambda')$$

が成立つ．またこの範囲の任意の $x^{(s)}, h^{(s)}$ に対して

$$S(x^{(s+1)})-S(x^{(s)}) \leq -(B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)})+\lambda(C(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)})+\mu_\lambda|h^{(s)}|^2$$

である．δ_λ'' を補助定理6の系の δ_λ より小さく選ぶとき，補助定理6の系を用いて

$$(B_\lambda(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)}) \geq \lambda(C(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)})+\mu_\lambda|h^{(s)}|^2$$

が証明される．よって

$$S(x^{(s+1)}) \leq S(x^{(s)}).$$

参考文献

(1) Urabe, Minoru, *Error Estimation in Numerical Solution of Equations By Iteration Process*, J. Sci. Hiroshima Univ., Ser. A, 26 (1962) 77–91.

(2) Urabe, Minoru, Galerkin's Procedure for Nonlinear Periodic Systems, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 20 (1965) 120-152.

(3) 占部実, Numerical Method for Solving a system of Non-linear Equations. 数値解析セミナー(講究録)

(4) 田中専一郎, 数値解析における二三の問題, 流体力学と数値計算シンポジウム(講究録)